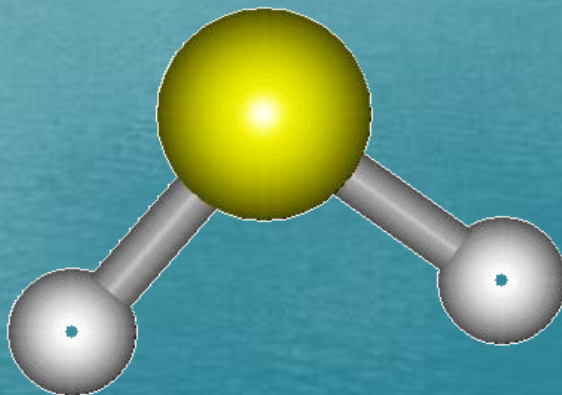


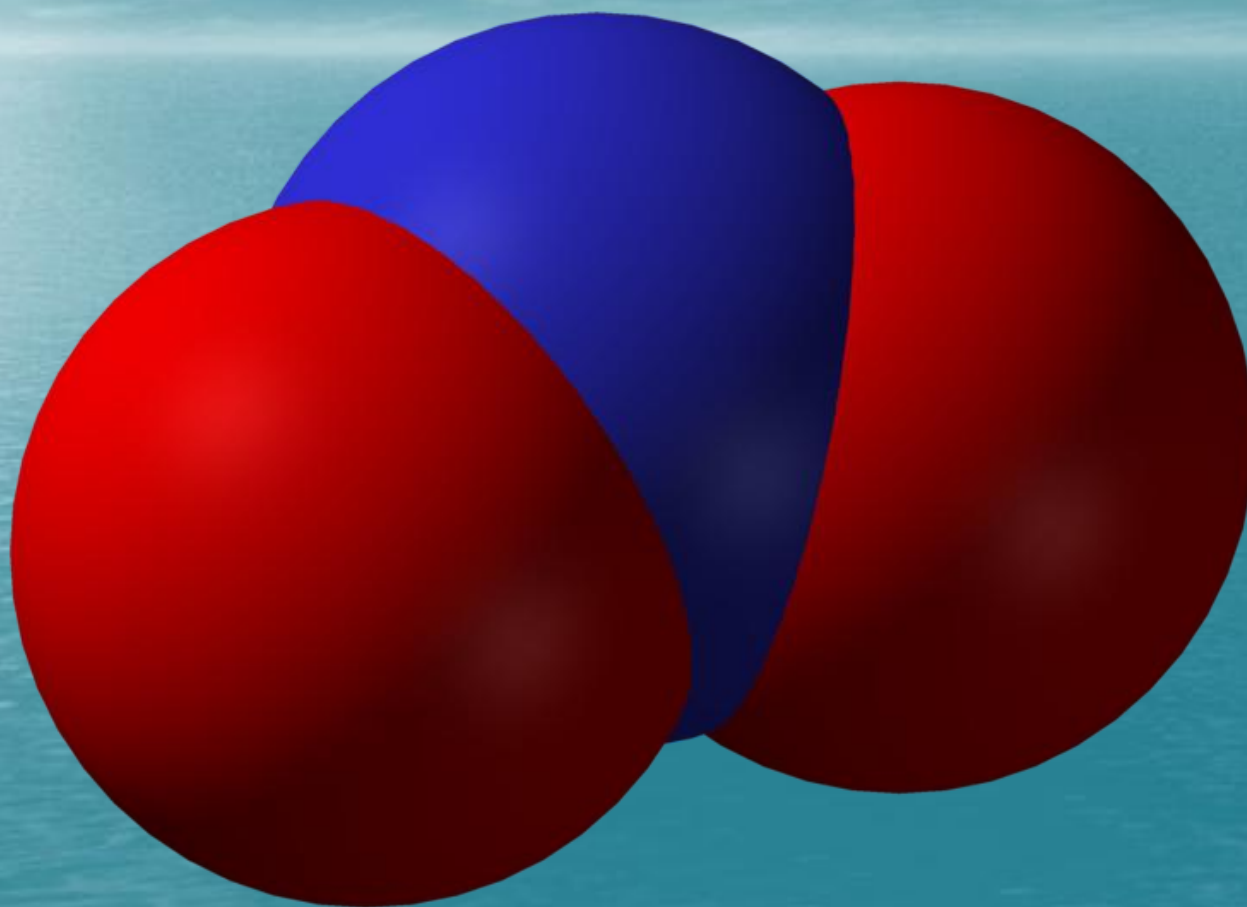
***РАЗЛОЖЕНИЕ
ТРЕХАТОМНОЙ
МОЛЕКУЛЫ
ВО ВНЕШНИХ
ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЯХ***

Расчетные свойства молекул водород содержащих соединений

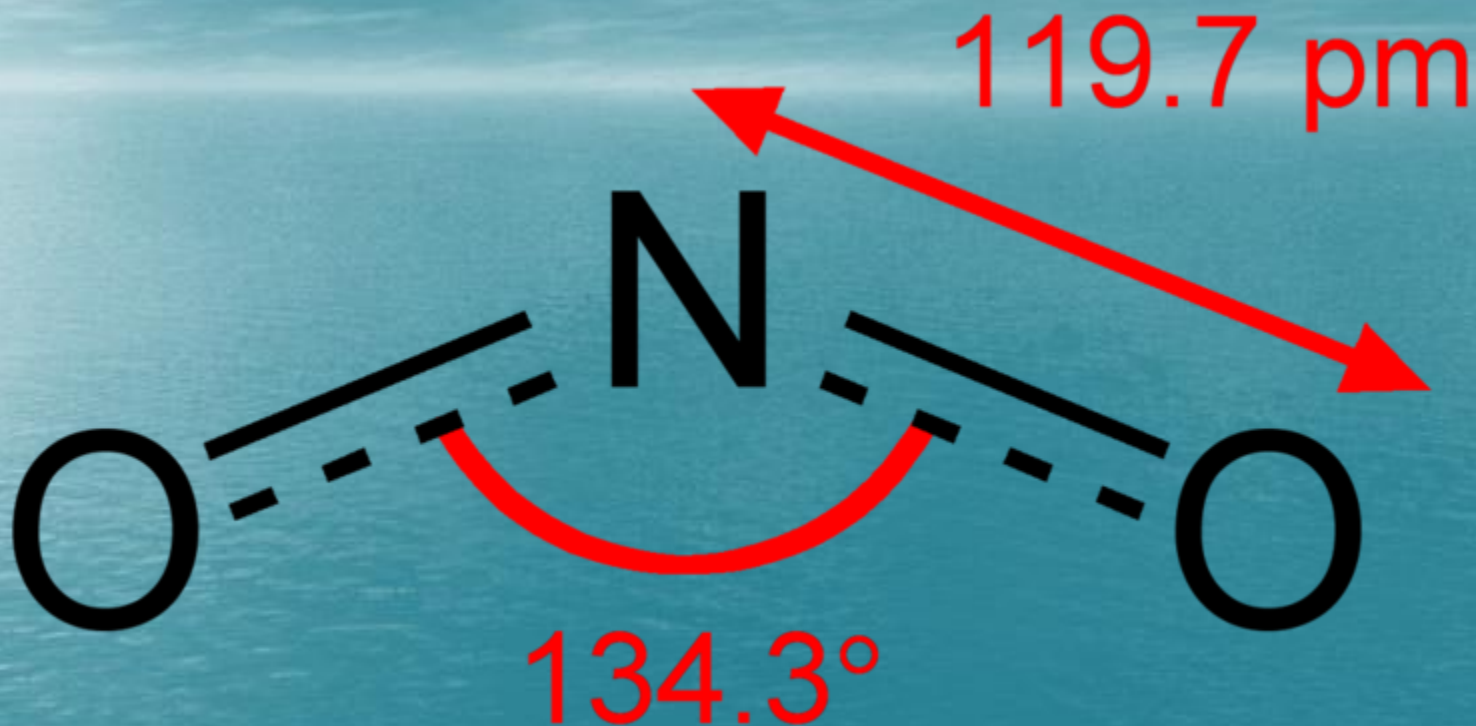


Молекула	- H_2S
длина связи, Å	- 1.32
валентный угол, град.	- 95.49

Диоксид азота



Диоксид азота



Энергия связи N - O определяется величиной 112 ккал/моль

где **Определение коэффициента фиктивной связи О - О и параметров ВМ**

$$\left\{ \begin{array}{l} m_O \frac{d^2 \vec{R}_{O_1}}{dt^2} = \vec{F}_{O_1} + \vec{F}_{O_1 N} + \vec{F}_{O_1 O_2}, \\ m_N \frac{d^2 \vec{R}_N}{dt^2} = \vec{F}_N + \vec{F}_{NO_1} + \vec{F}_{NO_2}, \\ m_O \frac{d^2 \vec{R}_{O_2}}{dt^2} = \vec{F}_{O_2} + \vec{F}_{O_2 N} + \vec{F}_{O_2 O_1}. \end{array} \right.$$

$\vec{R}_N = \{X_N, Y_N\}, \vec{R}_{O_1} = \{X_{O_1}, Y_{O_1}\}, \vec{R}_{O_2} = \{X_{O_2}, Y_{O_2}\}$ - радиус-векторы атомов азота кислорода, проведенные из центра масс;

$\vec{F}_N, \vec{F}_{O_1}, \vec{F}_{O_2}$ - векторы сил воздействия электромагнитного поля на атомы азота и кислорода;

$\vec{F}_{O_1 N}, \vec{F}_{NO_1}, \vec{F}_{O_2 N}, \vec{F}_{NO_2}, \vec{F}_{O_1 O_2}, \vec{F}_{O_2 O_1}$ - векторы сил воздействия атомов, обозначенных первыми, на атомы, обозначенные вторыми.

Рассмотрение проводится в системе центра масс и молекула неподвижна. Суммарное воздействие напряженности электрического поля на атомы молекулы равно нулю.

$$|\vec{F}_{O_1}| = |\vec{F}_{O_2}| = -\frac{1}{2}|\vec{F}_N| \equiv |F|$$

$$|\vec{F}| \propto d' \cdot E(t)$$

d' - производная от дипольного момента связи N – O по расстоянию между атомами,

$E(t)$ - амплитуда напряженности электрического поля, задаваемая извне

$\vec{F}_{AB} = -\vec{F}_{BA}$ - для сил внутри молекулы.

$\Pi_{AB}(\vec{r}) = D_{AB} \left(\exp(-2\alpha_{AB}(r - a_{AB})) - 2\exp(-\alpha_{AB}(r - a_{AB})) \right)$ Силы парные и центральные.
Потенциал Морзе

$$\vec{F}_{AB} = -\frac{d}{dr} \ddot{\Pi}_{AB}(\vec{R}_A - \vec{R}_B) \frac{\vec{R}_A - \vec{R}_B}{|\vec{R}_A - \vec{R}_B|}$$

Величина и направление действия силы между атомами А и В.

$$(2m_N a_{ON}^2 + m_O a_{OO}^2) C_{ON} - 2m_N m_O a_{ON}^2 \omega^2 = 0$$

$$2a_{ON}^2 m_N m_O^2 \omega^4 + (m_O^2 a_{OO}^2 C_{ON} - 4m_O^2 a_{ON}^2 C_{ON} - 4m_N m_O a_{ON}^2 C_{OO} - 2m_N m_O a_{ON}^2 C_{ON}) \omega^2 +$$

$$1618 4m_N a_{ON}^2 C_{ON} C_{OO} + 8m_O a_{ON}^2 C_{ON} C_{OO} - m_N a_{OO}^2 C_{ON} C_{OO} - 2m_O a_{OO}^2 C_{ON} C_{OO} = 0$$

Где: $C_{AB} = 2\alpha_{AB}^2 D_{AB}$

Таблица 1. Равновесные параметры молекулы двуокиси азота.

Параметр	Обозначение	Значение	
		Единицы СИ	Единицы Хартри
Масса атома азота	m_N	$2,325 \cdot 10^{-26}$ кг	25529
Масса атома кислорода	m_O	$2,657 \cdot 10^{-26}$ кг	29176
Энергия диссоциации связи N - O	D_{ON}	$7,781 \cdot 10^{-19}$ Дж	0,179
Равновесное расстояние связи N - O	a_{ON}	$1,190 \cdot 10^{-10}$ м	2,249
Равновесное расстояние связи O - O	a_{OO}	$2,190 \cdot 10^{-10}$ м	4,138
Частота антисимметричных колебаний	$\omega_0 \equiv \omega_a$	1618 $см^{-1}$	$7,37 \cdot 10^{-3}$
Частоты симметричных колебаний	$\omega_1 \equiv \omega_s^{(1)}$	1318 $см^{-1}$	$6,00 \cdot 10^{-3}$
	$\omega_2 \equiv \omega_s^{(2)}$	750 $см^{-1}$	$3,42 \cdot 10^{-3}$

Система единиц Хартри - одна из естественных систем единиц, в которой приравнены единицам следующие фундаментальные физические постоянные: заряд e и масса m_e электрона ($e = 1,6021892 \cdot 10^{-19}$ К и $m_e = 0,9109534 \cdot 10^{-30}$ КЗ), радиус Бора $a_0 = 0,52917706 \cdot 10^{-10}$ м и постоянная Планка $\hbar = h/2\pi = 1,0545887 \cdot 10^{-34}$ Дж/сек, т. е. за единицы длины и массы приняты a_0 и m_e , единица времени равна приблизительно $2,419 \cdot 10^{-17}$ сек. Применение единиц Х. с. е. позволяет упростить написание уравнений квантовой механики. Х. с. е. была предложена английским физиком Д. Хартри (D. Hartree) в 1928.

Заданы: ω_i . Необходимо определить: $x = \frac{m_O}{m_N}, y = \frac{1}{2} \left(\frac{a_{OO}}{a_{NO}} \right)^2$

$$G_{ON} \equiv C_{ON} \cdot m_O^{-1} = \frac{\omega_0^2}{1+xy}, G_{OO} \equiv C_{OO} \cdot m_O^{-1} = \frac{1}{2} (\omega_0^2 + \omega_1^2 + \omega_2^2) - \frac{1+x}{1+xy} \omega_0^2$$

$$Z^2(x, y) - Z(x, y)(1+x)(1+y) + 1 + x(2-y) - \left(\frac{1+xy}{2} \right)^2 \left(\left(\frac{\omega_1}{\omega_0} \right)^2 - \left(\frac{\omega_2}{\omega_0} \right)^2 \right)^2 = 0$$

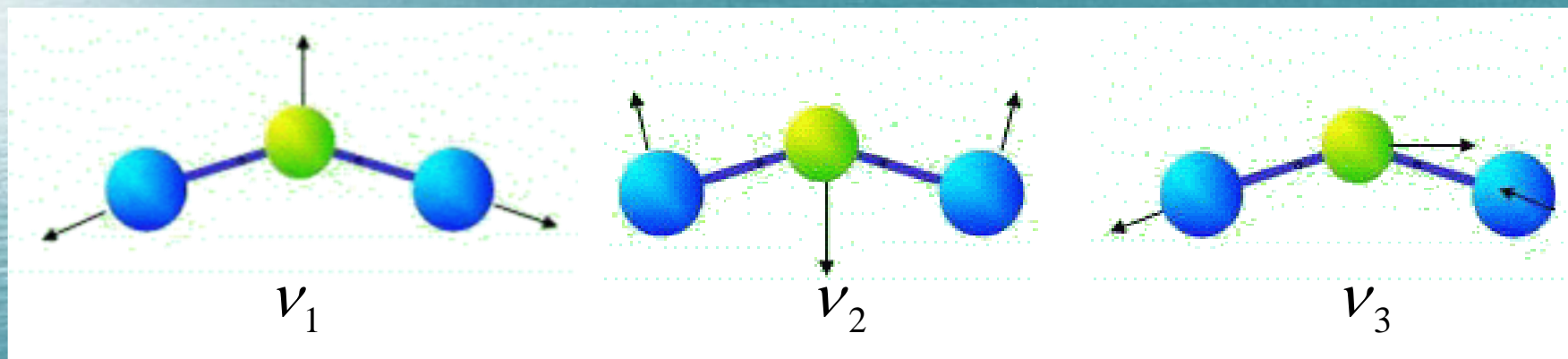
$$\text{Где: } Z(x, y) = \frac{1+xy}{2} \left(1 + \left(\frac{\omega_1}{\omega_0} \right)^2 + \left(\frac{\omega_2}{\omega_0} \right)^2 \right) - x - 1$$

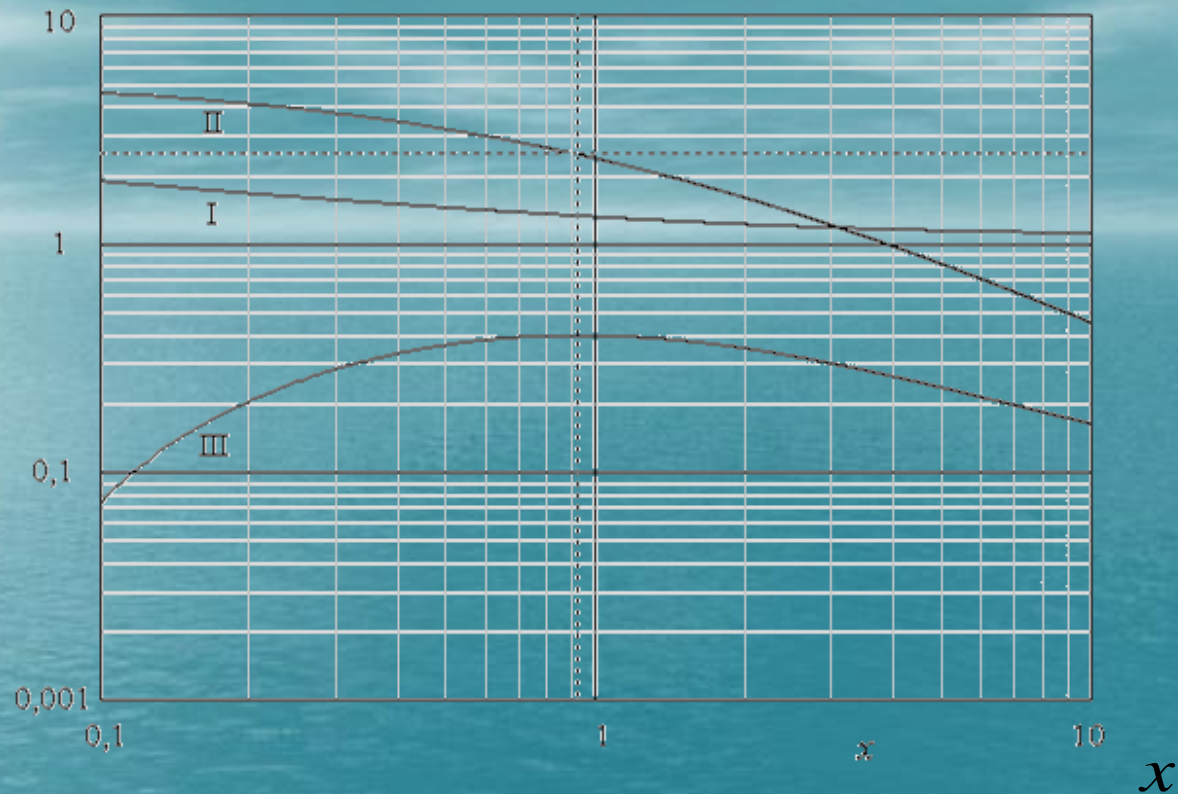
Трехатомная молекула $AХ_2$ имеет три нормальных колебания:

Колебание ν_1 называется симметричным валентным колебанием (растяжения связей);

ν_2 - деформационным колебанием (изменение валентного угла);

ν_3 - антисимметричным валентным колебанием.





Зависимость решения уравнения (9) y от параметра x - кривая

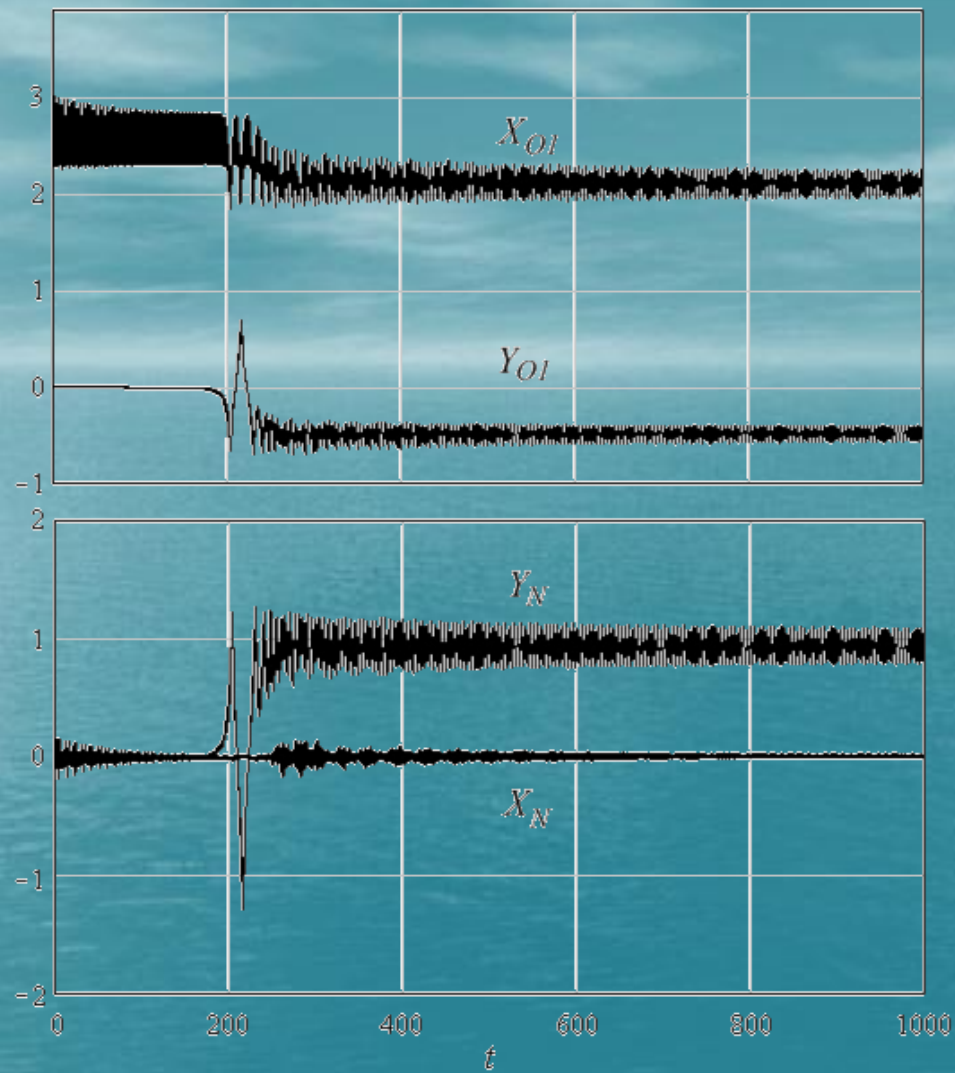
I. Зависимость значений жесткостей молекулы от параметра :

$G_{ON} \cdot 10^5$ - кривая II; $G_{OO} \cdot 10^5$ - кривая III.

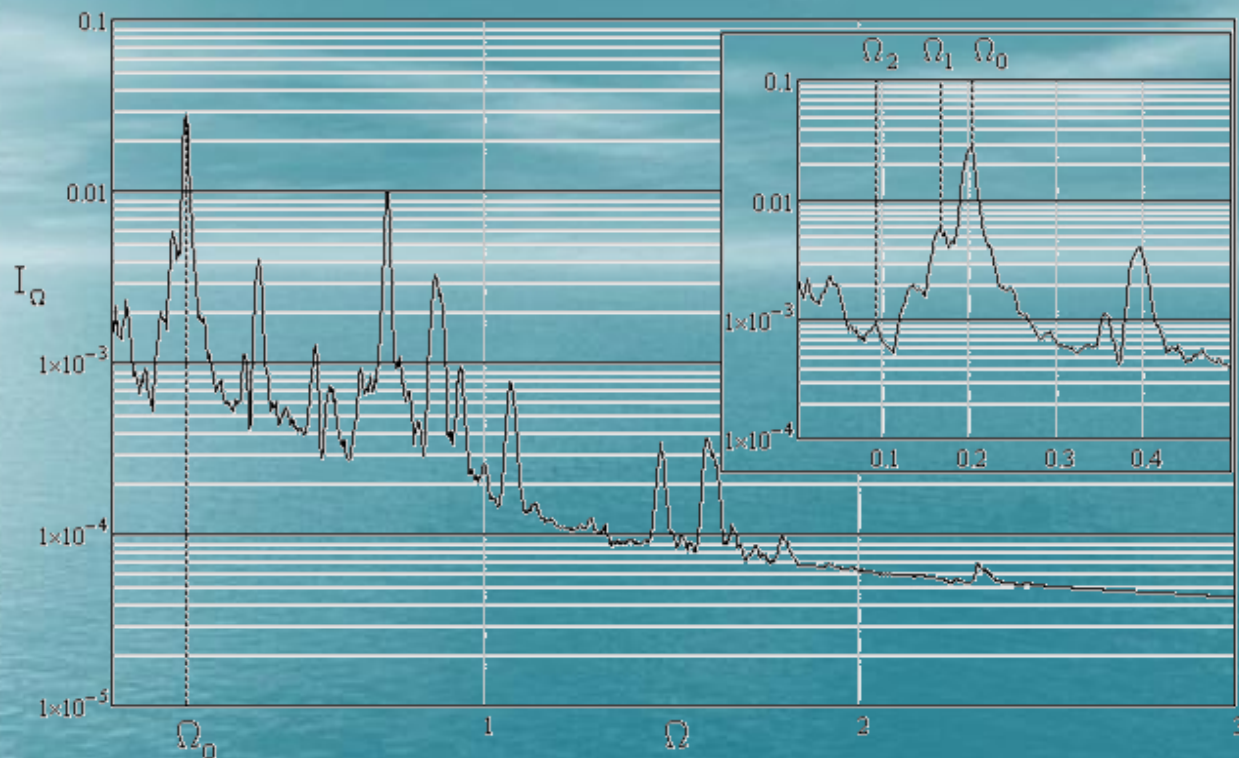
При вычислениях полагаем: $D_{OO} \square 0,2 \cdot D_{ON}$

Параметры ВМ.

Параметр	Обозначение	Единицы Хартри
Масса атома азота (перенормированная)	m_N^*	31713
Масса атома кислорода	m_O	29176
Коэффициент жесткости связи N - O	C_{NO}	0,715
Коэффициент жесткости связи O - O	C_{OO}	0,115
Равновесное расстояние связи N – O (перенормированное)	a_{NO}^*	2,663
Равновесное расстояние связи O - O	a_{OO}	4,138
Ширина потенциальной ямы для связи N - O	α_{ON}	1,413
Ширина потенциальной ямы для связи O - O	α_{OO}	1,267
Валентный угол	ψ	108,808°



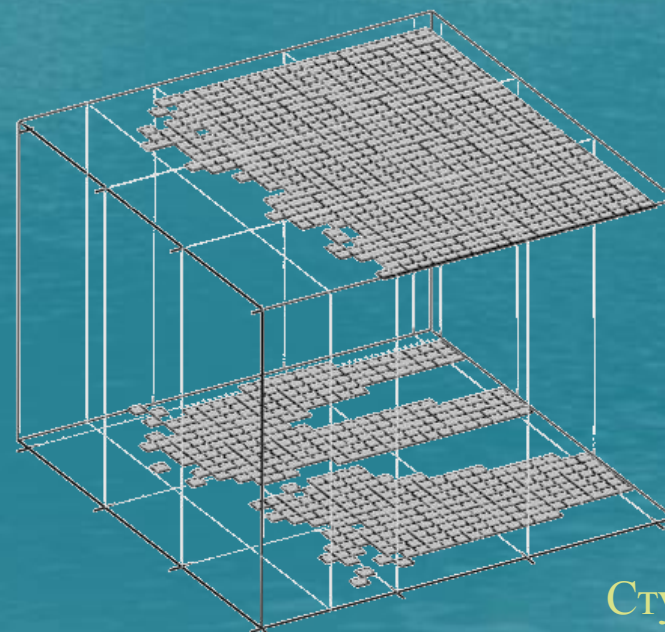
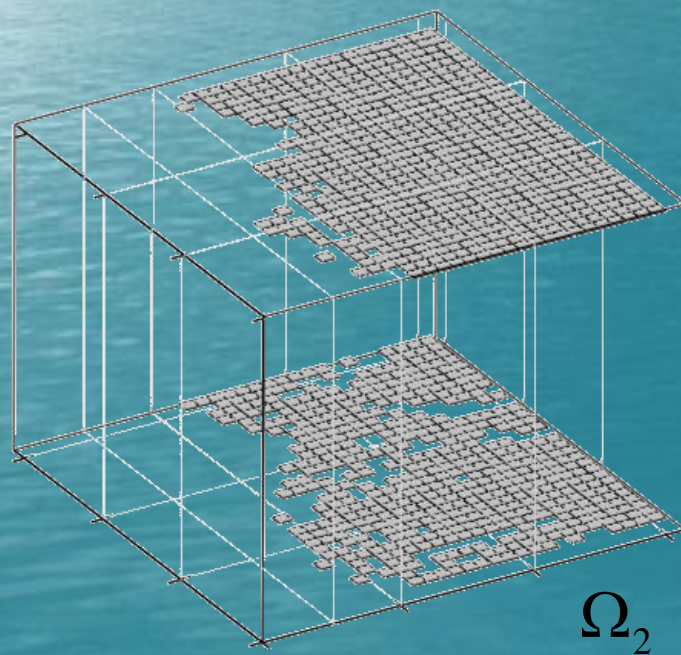
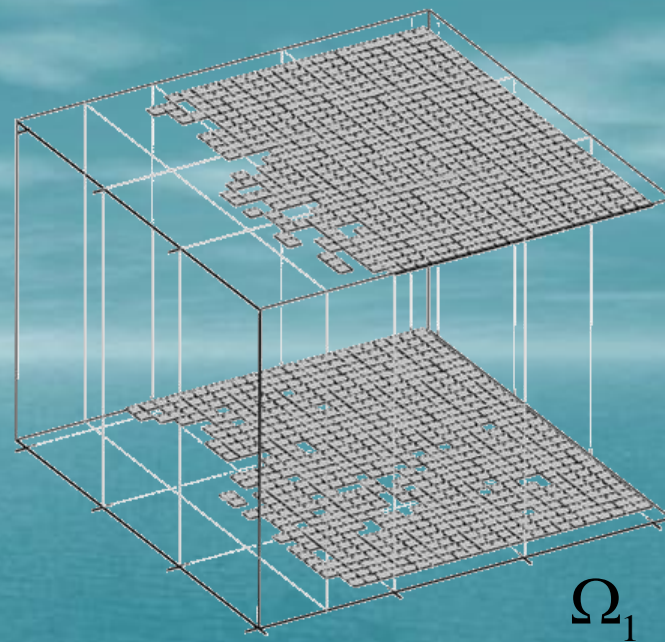
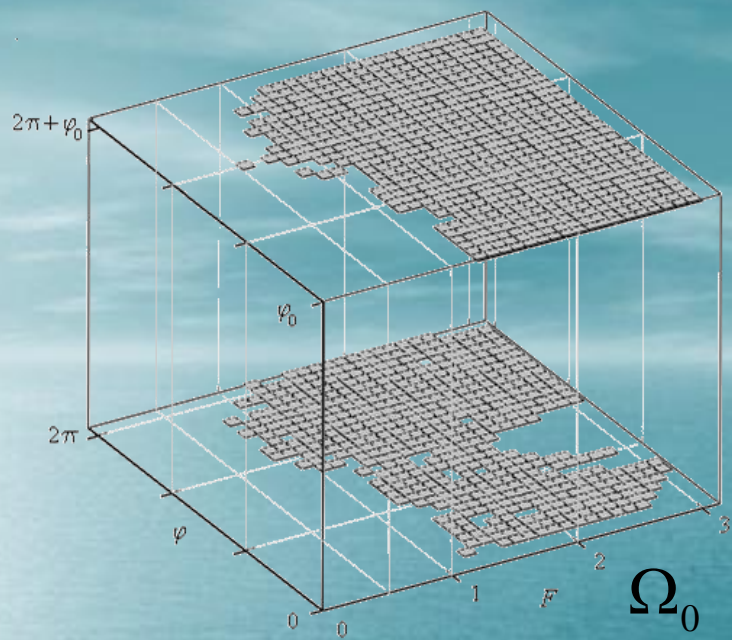
Зависимость координат атомов кислорода и азота в молекуле от времени t .



Усредненная и сглаженная интенсивность спектра колебаний атомов ВМ двуокиси азота I_{Ω} . Отмеченные пунктирной линией пики, после соответствующих преобразований, совпадают с резонансным частотам реальной молекулы двуокиси азота ω_i .

	Оптимальные параметры диссоциации ВМ	
Частота электромагнитного поля	Сила F	Угол воздействия φ
Ω_0	0,6	$2\pi(2/3) \leq \varphi \leq 2\pi(21/30)$
Ω_1	0,7	$2\pi(11/30) \leq \varphi \leq 2\pi(2/5)$ $2\pi(11/30) \leq \varphi \leq 2\pi(2/5)$ $2\pi(13/30) \leq \varphi \leq \pi$
Ω_2	0,7	$2\pi(1/3) \leq \varphi \leq 2\pi(2/5)$
Постоянное поле	0,6	$2\pi(23/30) \leq \varphi \leq 2\pi(4/5)$

Реальное значение внешней силы в единицах Хартри F_x связано с величиной силы F соотношением: $F_x = F \cdot 1,818 \cdot 10^{-6}$.



Выводы

- предложена модель описания реальной молекулы двуокиси азота ее двумерным аналогом – витруальной молекулой (ВМ);
- обеспечено условие совпадения собственных частот молекулы и ее аналога;
- остальные параметры ВМ (длина связей и массы атомов) перенормированы таким образом, чтобы ВМ устойчиво существовала длительный интервал времени;
- исследовано действие внешней силы на диссоциацию молекулы после установления собственных колебаний;
- в результате численного моделирования установлено, что разрыв связей имеет пороговый характер (порог при $F \leq 0,5 \div 0,8$);